

# Modélisation d'un réacteur électrochimique pour la production d'hydroxyde de calcium en milieu aqueux

Simon LAURENT<sup>1</sup>, Diane THOMAS<sup>2</sup> et Guy DE WEIRELD<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Thermodynamique et Physique mathématiques, Université de Mons, Belgique*

<sup>2</sup>*Génie des Procédés chimiques et biochimiques, Université de Mons, Belgique*

simon.laurent@umons.ac.be

## RESUME

Dans le contexte de la lutte contre le changement climatique, l'électrification des procédés industriels est une des voies de réduction de la consommation d'énergie fossile et de limitation des émissions de gaz à effet de serre (GES). Plus particulièrement, le secteur de production du ciment et de la chaux est responsable d'environ 8%, selon Andrew R. M. en 2018, des émissions totales de GES, et est consommateur d'importantes quantités de combustible afin de chauffer et décarbonater le calcaire ( $\text{CaCO}_3$ ). Dans le procédé de production de chaux, le  $\text{CO}_2$  est produit par la combustion et par la réaction chimique menant à la chaux vive ( $\text{CaO}$ ) ( $1.2 t_{\text{CO}_2}/t_{\text{CaCO}_3}$ , selon Andrew, R. M. en 2018). 10% de cette chaux est commercialisée sous forme de chaux éteinte ( $\text{Ca(OH)}_2$ ) après hydratation.

Comme illustré très schématiquement à la Fig. 1, la solution envisagée par Ellis L. en 2019 est d'utiliser l'électrolyse de l'eau et la solubilisation du calcaire en milieu acide pour produire la chaux éteinte ainsi que les coproduits gazeux valorisables que sont l'hydrogène (libéré à la cathode), l'oxygène et le dioxyde de carbone (libérés à l'anode) tout en permettant une capture aisée de ce dernier par séparation du mélange gazeux  $\text{CO}_2/\text{O}_2$  (par exemple par adsorption). Ce procédé a été validé notamment par les travaux de Ramirez-Amaya D. en 2023.

L'objectif de cette étude est d'établir un modèle multiphysique et multidimensionnel du réacteur électrochimique. Ce modèle prend en compte l'impact des différents phénomènes ayant cours au sein de la cellule électrochimique primaire et, notamment, l'interaction entre ces phénomènes ; par exemple l'impact des phénomènes réactionnels sur la tension électrique dans la cellule. Les phénomènes pris en compte sont de nature chimique (dissolution du carbonate, précipitation de l'hydroxyde, équilibre calco-carbonique, équilibres de phases) et électrochimique (tension thermodynamique, activation des électrodes, résistances de solution et membranaire), de nature électrique (déformation du champ électrique par rapport aux éléments géométriques) et de nature hydrodynamique (convection forcée). Le modèle intègre également un ensemble de relations : bilans de matière et d'énergie, cinétique de dissolution du carbonate de calcium comme présenté par Compton, R. G. en 1990, et de précipitation de l'hydroxyde de calcium notamment.

La modélisation dans un environnement multidimensionnel permet de prendre en compte, de manière détaillée, l'impact de la géométrie de la cellule primaire ou bien l'élément de base servant à la création d'un stack.

Le modèle est à la fois réalisé dans l'environnement logiciel COMSOL Multiphysics (3D) et en langage Python (0D). L'utilisation d'un modèle 0D permet de réaliser des études préliminaires, de tester de nombreuses hypothèses rapidement, de valider des données expérimentales avant de réaliser une étude détaillée en 3D.

À terme, ce modèle permettra d'explorer les possibilités du procédé étudié ainsi que son optimisation, aussi bien concernant le choix des paramètres constructifs que celui des paramètres opératoires du réacteur électrochimique.

Les résultats obtenus par les modèles (0D-3D) sont adéquats avec les résultats expérimentaux. Nous sommes en mesure d'étudier les champs de concentrations (3D) pour les différentes espèces chimiques présentes dans

le réacteur. Ces champs de concentrations sont adéquatement impactés par la présence de la solution électrolytique mue par un champ de vitesse et par le champ électrique déployé entre les deux électrodes.

En outre, les zones critiques lors de la dissolution du calcaire, la précipitation du calcaire ou les zones chimiquement mortes peuvent également être identifiées afin d'adapter la géométrie des réacteurs.

## FIGURES

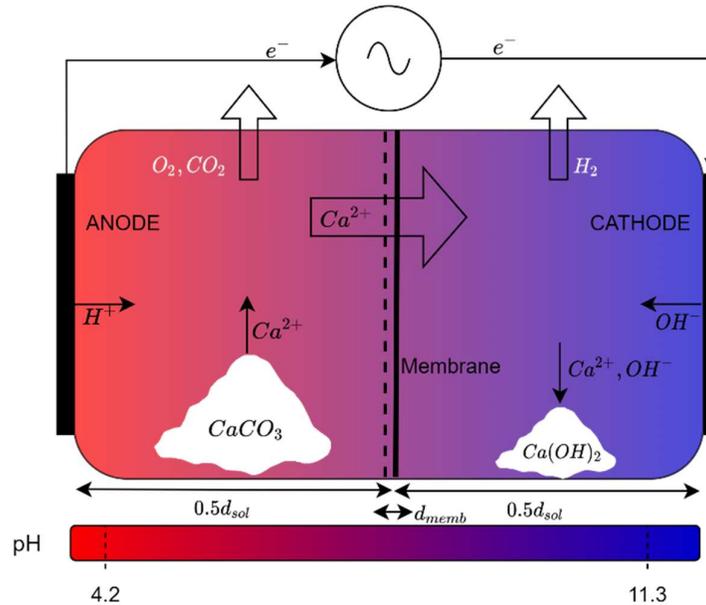


Fig. 1. Schéma du réacteur /cellule primaire

## MOTS-CLES DU THEME

Électrification des procédés, Procédés de ruptures : économie d'énergie.  
TRANSITION ENERGETIQUE ET INDUSTRIELLE

## MOTS-CLES LIBRES

Électrolyse, Chaux, Décarbonatation électrochimique

## RÉFÉRENCES

Andrew, R. M., 2018, Global CO<sub>2</sub> emissions from cement production, *Earth Syst. Sci. Data*, 10, 195–217, <https://doi.org/10.5194/essd-10-195-2018>

Ellis, L., Badel, A.F., Chiang, M.L., Park R.J., Chiang, Y.-M., 2019, Toward electrochemical synthesis of cement—An electrolyzer-based process for decarbonating CaCO<sub>3</sub> while producing useful gas streams, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(23), 12584-12591, <https://doi.org/10.1073/pnas.1821673116>

Ramirez-Amaya, D., Dreyse, P., Martinez, N.P., Tronsco, F., Navarette, I., Noël, M., Canales, R. I., González, M., 2023, Comparaison of the electrochemical decarbonation of different-grade limestones used in cement manufacturing, *Cement and Concrete Research* 174(2023), 107307, <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2023.107307>.

Compton, R. G.; Unwin, P. R., 1990. The Dissolution of Calcite in Aqueous Solution at pH Formula 4: Kinetics and Mechanism. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 330(1609), 1–45. <https://doi.org/10.1098/rsta.1990.0001>